

鋼材強化に資する微細析出物成長の計算機シミュレーション
Computational simulation of fine precipitate growth for strengthening of steel

澤田 英明
Hideaki Sawada

新日本製鐵株式会社 先端技術研究所
Advanced Technology Research Laboratories, Nippon Steel Corporation
URL <http://www.nsc.co.jp>

析出物は組織制御と強度に対する寄与によって鋼材強化に重要な役割を果たす。その析出物の析出や成長を決める重要な因子となる析出物と鉄母相の界面エネルギーを計算した。析出物と鉄母相の部分整合界面を扱うためには 1000 個以上の原子を扱う必要があり、計算量が計算規模に対して線形に増加するオーダーN法を用いることと、TSUBAME 利用によって成し遂げられた。Fe/NbC 界面では Fe と Nb は近寄りやすく、部分整合界面の層間距離は、Fe と Nb が近接した位置での距離になる。一方、界面エネルギーは、Fe と C が近接した整合界面での値と、Fe と Nb が近接した整合界面での値の間の値となる。

The precipitates in steel play an important role to strengthen steel. The important factor of controlling growth of the precipitate is interface energy between precipitate and iron. The interface energy is calculated by using the order-N method of the first-principles calculation on the TSUBAME supercomputer system, because the calculation needs to treat more than 1000 atoms. The distance between Fe and NbC layers of the semi-coherent interface is close to that of the coherent interface where Fe atom is located next to Nb atom. The interface energy of the semi-coherent interface is the value between the coherent interface energy where Fe atom is located next to Nb atom and that where Fe atom is located next to C atom.

Keywords: first-principles calculation, order-N method, interface energy, precipitate, iron

背景と目的

鋼中析出物は母相の鉄と整合した整合析出物として析出し、大きくなるにつれて母相中の蓄積する歪を解消するため、部分整合析出物に遷移する。しかし、析出物の析出や成長に対して重要な因子となる析出物と母相の界面性状や界面エネルギーを求めることは、整合界面に対しては可能でも、部分整合界面に対しては非常に大規模な計算を必要とするため不可能であった。今回、第一原理計算の大規模化可能なオーダーN法と、TSUBAME 利用による大規模計算によって、部分整合界面の界面性状と界面エネルギーを求めることに成功した。

概要

鋼中に生成する析出物は数多くあるが、鋼強度や組織形成過程において重要な役割を果たす析出物の 1 つとして NaCl 型析出物がある。NaCl 型析出物は bcc-Fe 母相と (100)NbC//(100)Fe、

[010]NbC//[011]Fe、[001]NbC//[0-11]Fe の Baker-Nutting の関係といわれる結晶方位関係を持つことが知られており、2nm 以下の極微小析出物は鉄母相と整合していると考えられている。しかし、析出物が大きくなるにつれて、母相中に蓄積された歪を解消するために、整合析出物から部分整合析出物に遷移する。整合界面と部分整合界面での界面エネルギーは、析出物の析出や成長に対して重要な因子であり、大規模計算が可能な第一原理計算のオーダーN法を用いることによって、計算に初めて成功した。

結果および考察

最初に、オーダーN法プログラム OpenMX によって、鉄中の欠陥や鉄と析出物との界面が従来法と同程度の精度で扱えることを確認した。表 1 には鉄中の空孔形成エネルギーをオーダーN法と比較した結果を示すが、従来法と同精度で計算できていることが分

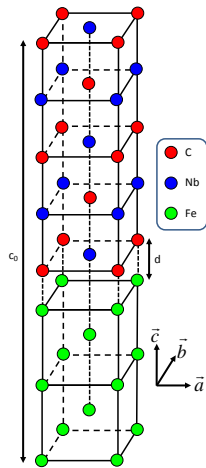
(様式第 20) 成果報告書

かる。

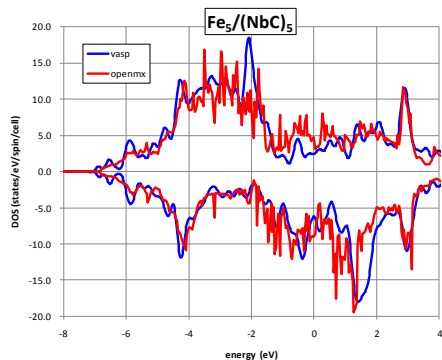
(表 1) 空孔形成エネルギー (eV)

構造最適化	従来法	従来法	オーダーN法	オーダーN法
エネルギー計算	従来法	オーダーN法	従来法	オーダーN法
空孔形成エネルギー	2.09	2.07	2.09	2.08

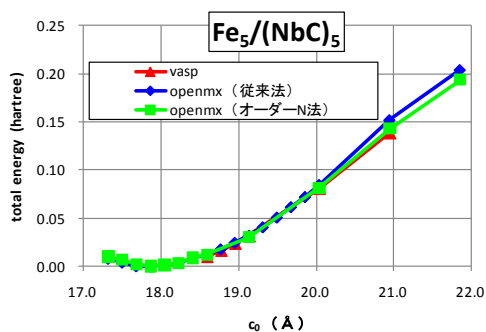
図 1 に示す鉄と NbC の整合界面構造 $Fe_5/(NbC)_5$ に対して、OpenMX と VASP で計算した電子状態密度と c 軸長さに対する全エネルギーの変化をそれぞれ図 2 と図 3 に示した。図から、両者がよく一致しており、オーダーN法によって Fe/NbC 界面を精度よく計算できることが確認できた。



(図 1) 整合界面構造



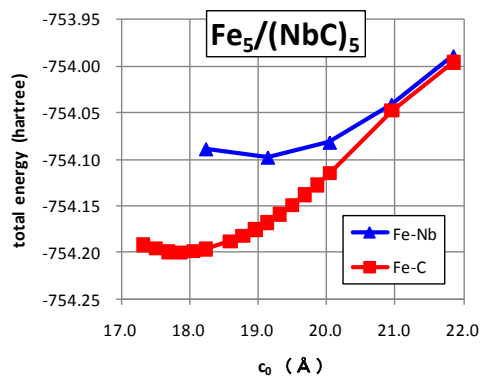
(図 2) $Fe_5/(NbC)_5$ の電子状態密度



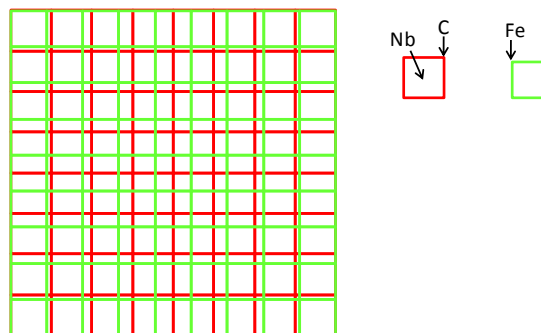
(図 3) $Fe_5/(NbC)_5$ の全エネルギーの c 軸依存性

図 1 では Fe と NbC の界面位置の Fe 原子に近接する原子は C 原子としたが、Nb 原子が Fe 原子の近接位置に存在する可能性があり、Fe 原子に近接する原子が C 原子の場合と Nb 原子の場合でのエネルギーの違いを調べた。図 4 から、Fe 原子の近接位置には C 原子が存在した方が安定であること、但し、Fe 層と

NbC 層の層間距離が離れていくと徐々にエネルギー差が小さくなり、 $c_0=21\text{\AA}$ 以上ではほぼ同じエネルギーを示すことが分かる。このことから、Fe 層と NbC 層が整合する場合には、Fe/NbC 界面では Fe 原子の近接位置には C 原子が存在することが分かる。一方、部分整合界面の場合には、図 5 に示すように、Fe 原子と C 原子が近接する場所だけではなく、Fe 原子と Nb 原子が近接する場所も存在するので、Fe 層と NbC 層との層間距離や界面エネルギーはこれまで分からなかった。



(図 4) Fe/NbC 界面の Fe 原子の近接原子が Nb 原子の場合と C 原子の場合の全エネルギーの違い

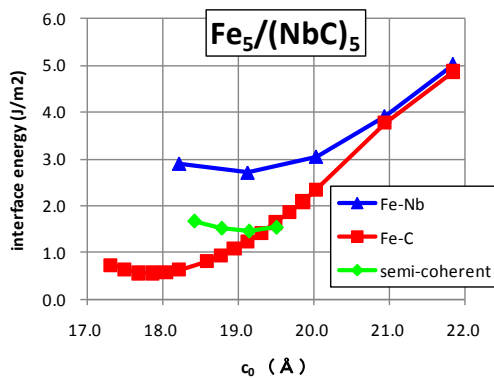


(図 5) Fe/NbC の部分整合界面 (Fe 単位胞 9×9 個と NbC 単位胞 8×8 個で部分整合した場合)

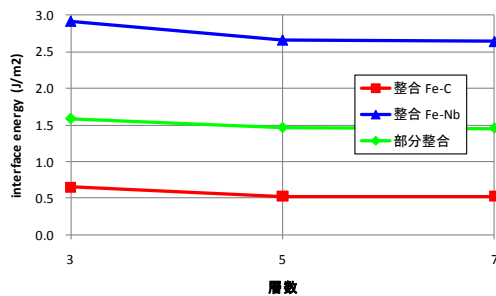
最後に、Fe/NbC の部分整合界面についての計算結果を示す。図 6 は図 4 に示した整合界面の界面エネルギーに、Fe 層 5 層、NbC 層 5 層の部分整合界面の界面エネルギーをプロットしたものである。部分整合界面の界面エネルギーは、Fe と C が近接した場合と Fe と Nb が近接した場合の整合界面の界面エネルギーの中間程度の値になること、c 軸の値 c_0 、つまり、Fe 層と NbC 層の層間距離 (図 1 の d) は Fe と Nb が近接した場合に近いことが分かる。図 7 は整合界面と部分整合界面の界面エネルギーの Fe 層と NbC

(様式第 20) 成果報告書

層の c 軸方向の層数依存性を示したものである。整合界面については、層数 5 層と 7 層では界面エネルギーに大きな差異はないことが図 7 から分かるが、d 値も 5 層と 7 層では大きな違いがないことが分かっている。部分整合界面については、Fe 層や NbC 層の層内の層間距離が 3 層のケースではバルクの値からずれており、層数が足りないことが分かっていたが、5 層ではその不具合が解消されていることを確認している。更に、7 層の計算による界面エネルギーが 5 層と大きな差異がないことを確認した。



(図 6) Fe 層 5 層 NbC 層 5 層での界面エネルギー



(図 7) 界面エネルギーの層数依存性

まとめ、今後の課題

鋼の強度制御のために重要な役割を果たす析出物の析出や成長を決める重要な因子となる析出物と鉄母相の界面エネルギーの計算に成功した。析出物と鉄母相の部分整合界面には 1000 個以上の原子を含む単位胞の計算が必要だが、第一原理計算のオーダーN法を用いることと、TSUBAME 利用によって、その計算を十分な精度で実施することに成功した。これまで、オーダーN法は主に生体高分子などの共有結合化合物に適用されてきたが、金属系への適用は進んでいなかった。この計算をきっかけに金属系への

適用が広がり、諸々の現象解明が進んでいくことを期待する。

今後は、他析出物と鉄母相との界面エネルギーの計算によって、析出物や母相の違いによるエネルギーの変化を計算することを計画している他、より大規模な計算を必要とする課題（例えば、転位と析出物との相互作用の計算など）への展開を検討する。